

## **КОНЦЕПЦИЯ ПОЛЕЙ СВОЙСТВ – МЕТОДИЧЕСКАЯ ОСНОВА ИЗВЛЕЧЕНИЯ ИНФОРМАЦИИ ИЗ ЭС-МОДЕЛЕЙ В КОМПЬЮТЕРНОМ МАТЕРИАЛОВЕДЕНИИ**

**Ляшенко Т. В.** (Одесская государственная академия строительства и архитектуры, г. Одесса)

Представлены базовые положения, возможности применения и перспективы концепции полей свойств как методической основы разработок высококачественных многокомпонентных строительных материалов.

**Многокомпонентность материалов и проблема моделей.** Основным направлением обеспечения требований к разнообразным свойствам современных строительных материалов и их гарантированного качества является существенное увеличение числа компонентов. Характерна «вложенная» многокомпонентность. Прогнозируется [1] постепенное замещение в ближайшем будущем традиционных бетонов многокомпонентными. Компоненты композиционных вяжущих могут представлять собой полиминеральные системы, комплексные модификаторы включают несколько индивидуальных химических добавок, используются активные минеральные компоненты разной дисперсности, смеси волокон разной длины, полифракционные наполнители и заполнители и т.д.

При исследовании и проектировании любых многокомпонентных материалов (на минеральных или органических связующих, твердеющих естественно или при тепловой обработке, конструкционных или отделочных и т. д.) приходится решать проблемы количественного анализа. Проводится поиск таких многокомпонентных составов и параметров технологии, которые обеспечили бы требуемые уровни свойств материала на разных этапах его жизни (свойств смеси, характеристик формирующейся структуры, функциональных свойств, показателей стойкости и долговечности).

Необходимые для этого математические модели должны связывать свойства – критерии качества  $Y$ , с параметрами состава, технологии и эксплуатации – рецептурно-технологическими (РТ) факторами  $x$ .

При решении конкретных РТ-задач (когда факторами можно управлять, но в относительно узких диапазонах значений) неизбежно использование экспериментально-статистических (ЭС) моделей [2-4]. Построение выводов

общего характера по этим моделям затрудняет и их форма (обычно, полином), не способствующая объяснению механизмов поведения материала – теряется свернутое в них знание о материале, которое потенциально ЭС-модели могут содержать. Снижению потерь, более полному извлечению информации способствует структурирование системы РТ-факторов. Выделяются их подсистемы (связанные с базовыми компонентами, с содержанием добавок, режимами технологии ... – в соответствии с природой, характером, степенью их влияния на свойства) и используются структурированные ЭС-модели (в том числе, со смесевыми и взаимонезависимыми факторами).

Развитие промышленности и задачи строительного материаловедения в «эру многокомпонентности» потребовали создания новой технологии исследований и проектирования высококачественных композиционных материалов.

Необходимость справиться с многомерностью задач и “сократить расстояние” между сложностью объекта и используемыми для его описания простыми полиномиальными моделями потребовали новых представлений и методов, позволяющих включить ЭС-моделирование в компьютерное строительное материаловедение [4, 5].

Компьютерное материаловедение, мультидисциплинарная наука о материалах, способно соединить описания поведения материала в конкретных рецептурно-технологических условиях с фундаментальными знаниями. Синтетическое по своей сути, оно может инкорпорировать модели любой генерации, в том числе, ЭС-модели, реализовывать вычислительные эксперименты (ВЭ) на моделях, наполнять базы знаний о материалах для экспертных систем.

Однако, для превращения количественных оценок, получаемых по ЭС-моделям, в знания, для того, чтобы задачи ВЭ ставились, а результаты интерпретировались в терминах материаловедения, необходимо, чтобы эксперименты на ЭС-моделях получили некоторую универсальную, общенаучную основу (мета-представление).

Такое модельное представление как поле физической величины в трехмерном пространстве соответствует еще более общему математическому понятию поля величины  $Y$ , которое определяется как функция точки  $x$  в области  $\Omega_x$  многомерного пространства, т.е. как совокупность значений  $Y$  для всех возможных значений  $x$ .

Это позволяет рассматривать совокупности всех возможных значений критериев качества материала при всех возможных значениях РТ-факторов как поля свойств материала в координатах состава, параметров технологии и эксплуатации (а также в координатах изделия) [3-6].

Таблица 1

## Основные обобщающие показатели полей

$G_Y$	$G_{K_b}$	полного поля $K_b(x_1, x_2, x_3)$	локальных полей $K_b(x_2, x_3)$	
			при $x_1 = -1$	при $x_1 = 1$
Максимальный уровень поля $Y_{\max}$	$K_{b,\max}$	68.88	68.88	48.55
Координаты максимума $x_{\max}$	$x_{1,\max} (X_{1,\max})$	-1 (10)		
	$x_{3,\max} (X_{3,\max})$	-1 (10)	-1	-1
	$x_{2,\max} (X_{2,\max})$	0.01 (12.1)	0.10	0.10
Минимальный уровень $Y_{\min}$	$K_{b,\min}$	26.18	26.18	34.03
Координаты минимума $x_{\min}$	$x_{1,\min} (X_{1,\min})$	-1 (10)		
	$x_{3,\min} (X_{3,\min})$	+1 (40)	1	0.54
	$x_{2,\min} (X_{2,\min})$	-1 (0)	-1	-1
Абсолютный перепад (прирост) $\Delta Y = Y_{\max} - Y_{\min}$	$\Delta K_b$	42.70	42.70	14.52
Расстояние между экстремумами, в единицах факторного пространства, $L_{\text{ext}}\{Y\}$	$L_{\text{ext}}\{K_b\}$	2.28	2.28	1.89
Усредненный градиент $\nabla Y = \Delta Y / L_{Y,\text{ext}}$	$\nabla K_b$	18.72	18.72	7.68
Относительный прирост $\delta Y = Y_{\max} / Y_{\min}$	$\delta K_b$	2.63	2.63	1.43
Градиент по относительному приросту $\nabla_{\delta} Y = \delta Y / L_{\text{ext},Y}$	$\nabla_{\delta} K_b$	1.154	1.154	0.755
Медианное среднее $Y_M = 0.5(Y_{\max} + Y_{\min})$ с координатами $x_{iM} = (x_{i,\max} + x_{i,\min}) / 2$	$K_{b,M}$	47.53	47.53	41.29
Индекс прироста качества $I_Q$ (критерия, $I_Y$ ) $I_Y = 0.5(Y_{\max} - Y_{\min}) / (0.5(Y_{\max} + Y_{\min})) = 0.5(Y_{\max} - Y_{\min}) / Y_M$	$I_{K_b}$	0.449	0.449	0.176
Размер (объем) допустимой области $\Omega\{Y_H\}, \%$	$\Omega\{K_b \geq 40\}$	83	71.8	73.1

Разработана [7] концепция полей свойств как элементов компьютерного материаловедения, в которое ЭС-модели включаются в качестве моделей рецептурно-технологических полей свойств материалов. Базовые положения концепции и ее операционная составляющая представляют методическую основу технологии исследования и проектирования многокомпонентных строительных композитов гарантированного качества.

**Основные положения концепции полей свойств и средства ее реализации.** Поле  $Y(x_1, x_2, \dots, x_k)$  свойства материала в  $k$  координатах его состава, режимов приготовления и условий эксплуатации соединяет многообразие «воздействий» РТ-факторов на материал с результатами этих воздействий (уровнями любых критериев качества) и служит аналогом материала в исследованиях и проектировании отдельных сторон его поведения.

Вместо дополнительных ресурсоемких экспериментов с реальными материалами выполняются вычислительные эксперименты на полях свойств. Их цель – наиболее полное извлечение информации о материалах из описывающих поля ЭС-моделей, построенных по реальным данным.

Для анализа отношений между свойствами и факторами поверхность многомерного поля свойства  $Y$  заменяется ограниченным набором чисел (характеристиками особых точек поля, размерами специальных областей и т.п.), которые используются как обобщающие поле показатели  $G_Y$  (табл. 1).

Полное поле свойства описывается по данным спланированного натурального эксперимента первичной ЭС-моделью.

Из полных полей в соответствии с целями анализа и оптимизации выделяются локальные поля, как правило, меньшей размерности. При этом

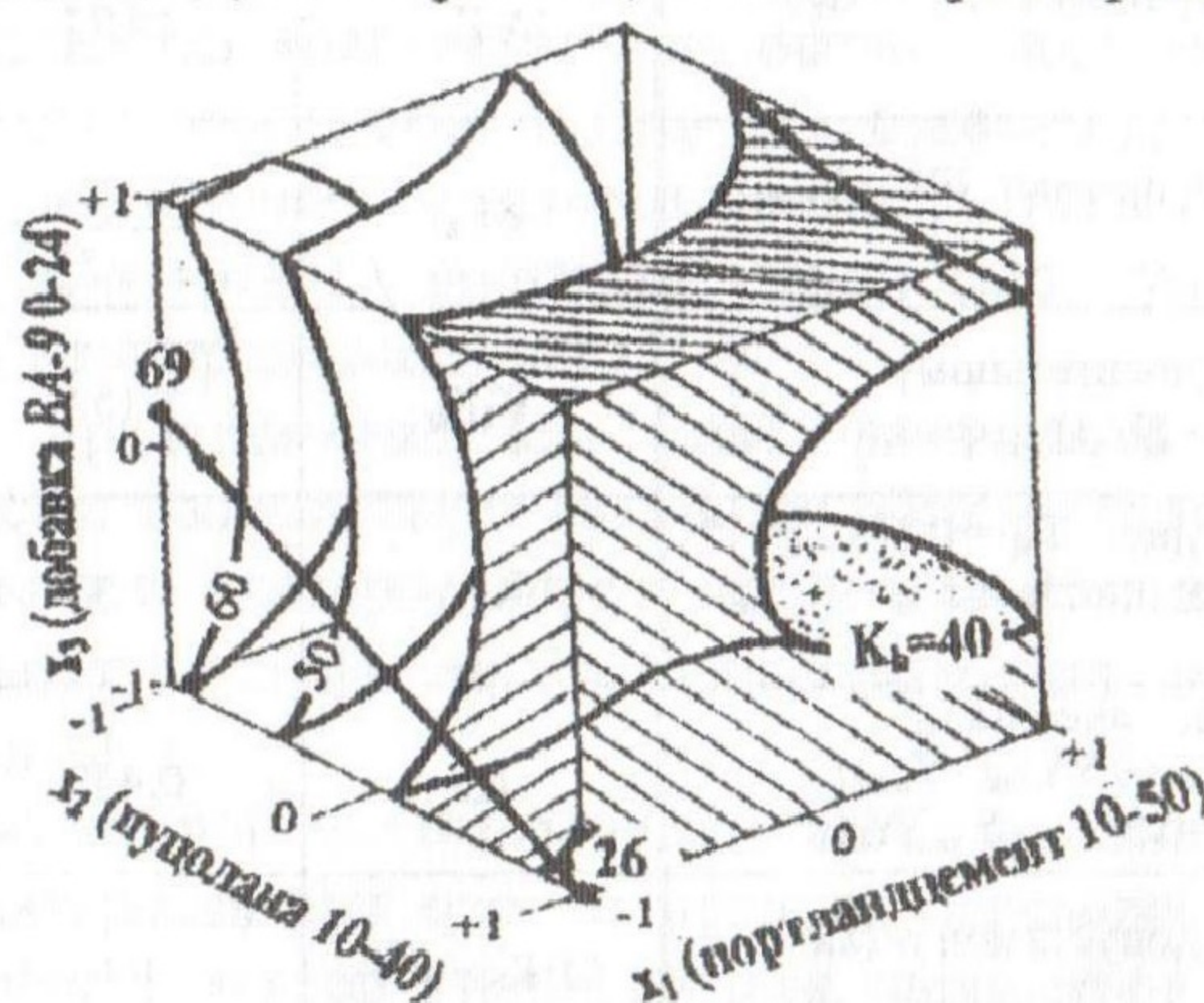


Рис. 1. Полное поле критерия  $K_b$  в координатах факторов состава

факторы (обычно, нормализованные  $|x| \leq 1$ ) разделяются на формирующие локальное поле градиентные ( $x_{gr}$ ) и изменяющие это локальное поле факторы ( $x_{ch}$ ). Переход от полного поля к локальным позволяет визуализировать многомерные связи факторов и свойств (с помощью диаграмм «квадраты на квадрате», «треугольники на квадрате», «треугольники на треугольнике» и т.п. [2-4]).

На рис. 1 показано полное трехфакторное поле отношения пределов прочности при изгибе и сжатии  $K_b = 100 \cdot R_b/R$ , критерия качества структуры модифицированного известково-песчаного раствора для реставрации исторических зданий. Особенности поля выражают его обобщающие показатели (табл. 1). Так,  $\delta = 2.63$  есть относительный перепад уровня  $K_b$  за счет управления составом, а  $\Omega\{K_b \geq 40\} = 83$  – величина области допустимых составов (% от всей области составов). Трансформацию локального поля  $K_b(x_2, x_3)$  под влиянием изменяющего фактора  $x_1$  (рис. 2.а-б) отражают показатели  $G_{K_b}$ .

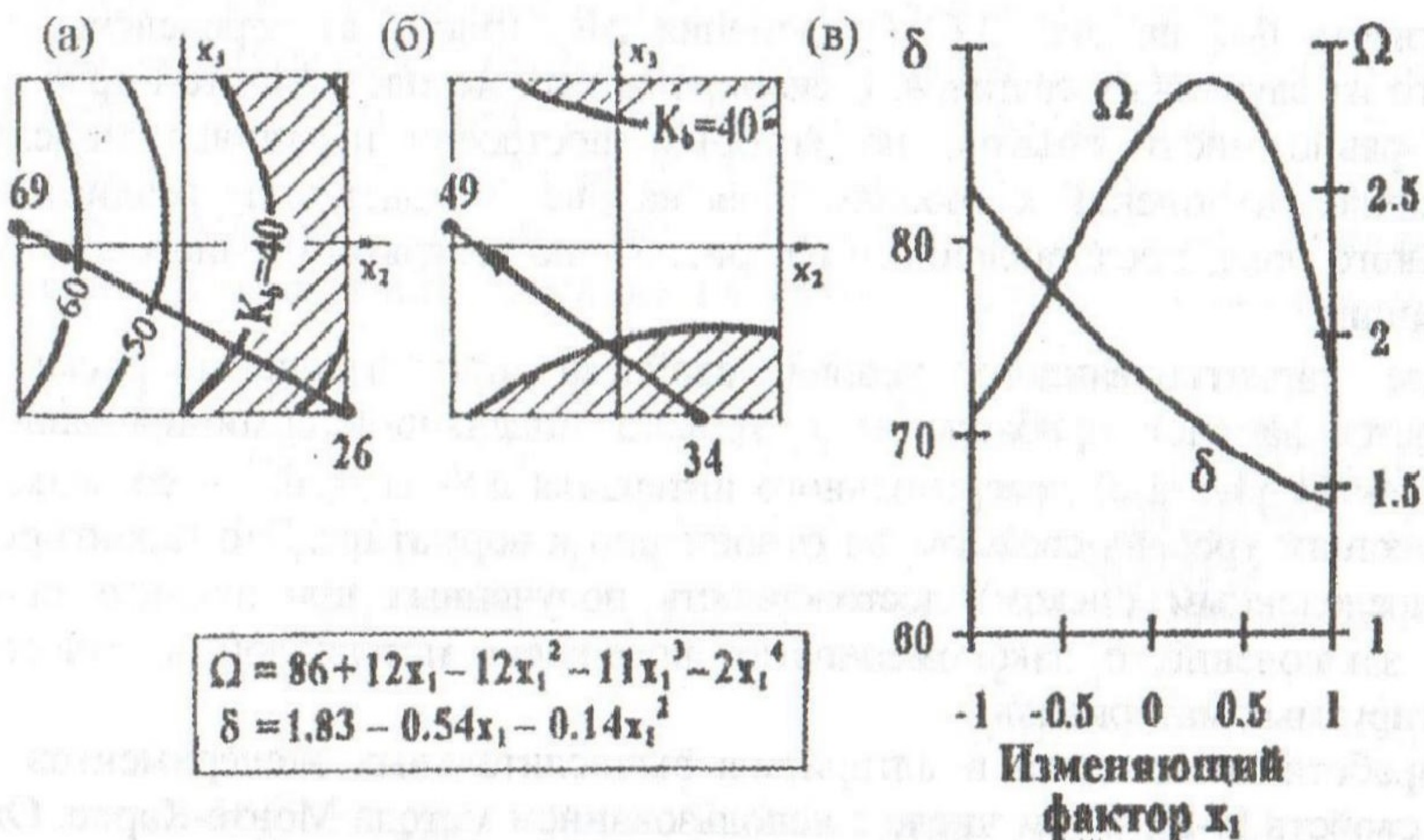


Рис. 2. Локальные поля  $K_b$  с градиентными факторами  $x_2$  (пуццолана) и  $x_3$  (добавка) при количестве цемента 10 (а) и 50 м.ч. (б), изменения (в) двух обобщающих показателей поля  $K_b(x_2, x_3)$  под действием изменяющего фактора  $x_1$  (цемент)

В таблице приведены их значения при низком и высоком содержании цемента, а на рис. 2.в показаны изменения  $\Omega\{K_b \geq 40\}$  и  $\delta$ , описанные вторичными моделями.

Для приближения вычислительного эксперимента к натурному модельно-детерминированный уровень свойства в любой точке поля превращается в случайный – за счет учета отклонений  $\Delta Y = \pm t \cdot s_e \cdot d^{0.5}$ , включающих ошибку

натурного эксперимента  $s_e\{Y\}$ , значение функции дисперсии предсказания  $d$  (зависящее от структуры модели, плана эксперимента и координат точки) и случайное значение  $t$  из стандартного нормального распределения.

Модель на рис. 3 описывает влияние состава бетона на предел прочности при растяжении ( $s_e=0.1$  МПа; значимы 11 эффектов при риске  $\alpha=0.05$ ). Модель структурирована так, что в блок (а) входят базовые факторы – содержание цемента (в диапазоне 250-310 кг/м<sup>3</sup>, при  $V=200$  дм<sup>3</sup>/м<sup>3</sup>) и отношение Ц/П (1.98-2.48), а в блок (б) два фактора «модификации» – дозировки добавки НГР-1 (0.42-0.7 кг/м<sup>3</sup>) и тонкомолотого доломита (10-60 кг/м<sup>3</sup>). Оценки в блоке (с) выражают изменения в эффектах базовых компонентов при введении модификаторов (или в эффектах модификаторов, если варьируется базовый состав бетона).

Локальное модельно-детерминированное поле  $R_{bt}(x_1, x_2)$ , с градиентными факторами базового состава при максимальном количестве добавки и наполнителя, показано на рис. 3.а. Этим условиям соответствует поверхность  $d_{R_{bt}}$  на рис. 3.б. Отклонения  $\Delta R_{bt}$  (рис. 3.в) определены для каждого из случайных составов, сгенерированных методом Монте-Карло (их число равно числу опытов, по которым построена первичная модель). Добавление отклонений к уровням поля на рис. 3.а дает одну реализацию случайного поля, представленного на рис. 3.г по результатам многократных реализаций.

Поле гарантированного уровня свойства при заданном риске  $\alpha$  получается за счет прибавления к уровню модельно-детерминированного поля (как на рис. 3.а) доверительного интервала  $\Delta Y = \pm t_\alpha \cdot s_e \cdot d^{0.5}$  – со знаком, ухудшающим уровень свойства по отношению к нормативу. Это гарантирует (с определенным риском) достоверность полученных при анализе таких полей заключений о закономерностях поведения материалов и качество проектируемых материалов.

Разработаны методика и алгоритмы вычислительных экспериментов на полях свойств [4-8], в том числе с использованием метода Монте-Карло. Они позволяют получить распределения показателей  $G$  полей свойств и их взаимосвязей, проанализировать зависимости  $G_{x_{gr}}(x_{ch})$ , выполнить изопараметрический анализ с учетом доверительных коридоров и выбрать рецептурно-технологические решения, гарантирующие соответствие требованиям к материалу и оптимальность по ряду свойств. Алгоритм ВЭ с многократным воспроизведением (бутстреп-методом [9]) результатов испытаний материала в натурном эксперименте дает возможность получить распределения и интервальные оценки вероятностных критериев качества.

Специально выполнены ВЭ, позволившие определить влияние ошибок эксперимента, числа генераций и других параметров на точность оценок, получаемых при использовании разработанных средств.

**Эффективность и перспективы применения.** Распространение понятия поля (элемента междисциплинарного языка) на свойства материала в РТ-координатах открыло ряд новых возможностей для строительного материаловедения.

Стало возможным корректно использовать в науке о строительных материалах связанные с полем общенаучные понятия градиента, линии равного потенциала и т.д.

Поля свойств можно сравнивать, используя в качестве мер сравнения, критериев анализа и оптимизации обобщающие показатели  $G_Y$ ; трудно сравнивать ЭС-модели  $Y(x)$  или их «куски», но можно сравнить поля  $Y(x)$  разных свойств или локальные поля одного свойства.

Рассматривая локальное поле  $Y$  в координатах части РТ-факторов ( $x_{gr}$ ), можно с помощью вторичных моделей  $G_Y(x_{ch})$  проанализировать изменения этого поля под влиянием остальных факторов. При анализе удобно использовать графические отображения – «карты полей», с изолиниями и особыми точками (в частности, лучшего и худшего уровня поля).

Можно исследовать взаимосвязи между полями свойств (рассматривать взаимосвязи ЭС-моделей неправомерно). Это важно при проектировании материала (чтобы знать, может ли улучшение по одному свойству изменить другое и насколько), при экспресс-контроле уровня свойства по измеряемому уровню другого (когда описание их связи определяет точность контроля),

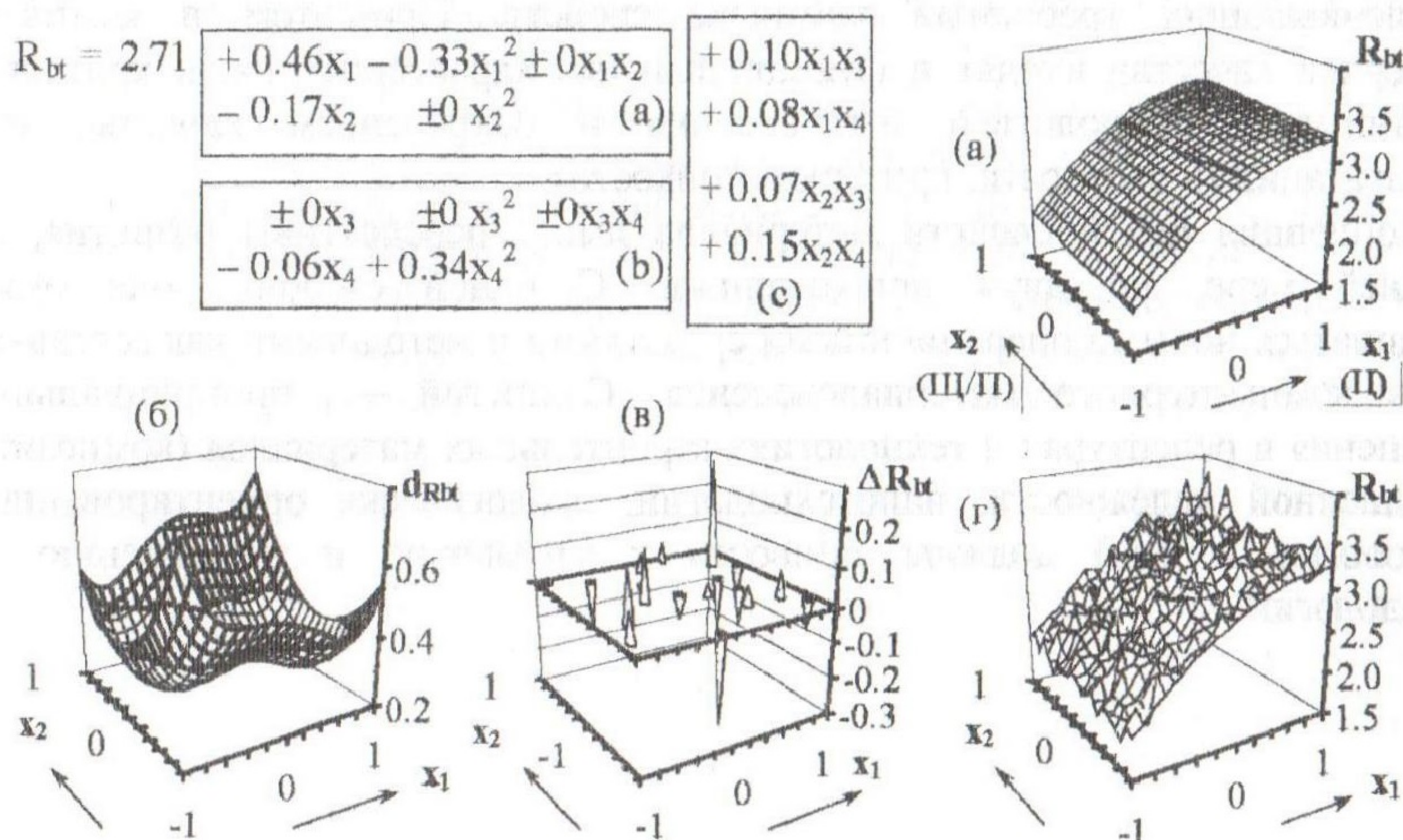


Рис. 3. Структурированная ЭС-модель прочности бетона  $R_{bt}$ ;  
 а – модельно-детерминированное поле  $R_{bt}(x_1, x_2)$  при  $x_3 = x_4 = +1$ ;  
 б – соответствующая функция дисперсии предсказания  $d(x_1, x_2)$ ;  
 в – случайные отклонения; д – случайное поле  $R_{bt}(x_1, x_2)$

при формулировке гипотез и выводов о механизмах структурообразования и деструкции (на которые могут указать изменения характера связей). На поверхности равного потенциала поля одного из свойств можно провести «изопараметрический анализ» других свойств.

Концепция полей свойств оказалась эффективной и перспективна при решении рецептурно-технологических задач, связанных со всеми этапами жизни материалов (разной природы и назначения).

Для управления течением технологических смесей при перемешивании, укладке и уплотнении влияние РТ-факторов на параметры реологических моделей (фундаментальной основы создания дисперсных систем и управления их свойствами) анализируется на полях этих параметров [2, 7, 8].

Критериями анализа кинетики и сравнения процессов структурообразования в разных РТ-ситуациях служат обобщающие показатели  $G_S$  временных полей  $S(\square)$  структурных характеристик (уровни экстремумов, их координаты, характеристики других «полезных» точек). Для управления процессами на этапе структурообразования анализируются РТ-поля показателей  $G_S$  [7], что особенно эффективно в сочетании с современными приборами и методами измерения  $S$ .

На полях свойств успешно решаются [2-7] проблемы выбора рациональных составов композиционных материалов для специальных строительных объектов, в том числе составов, гарантированно обеспечивающих требуемый комплекс свойств. При этом в комплекс критериев качества входят и функциональные характеристики, и критерии, связанные с технологией изготовления и сохранением качества при эксплуатации (в частности, критерии стойкости).

Концепция полей свойств материалов имеет перспективы развития, по крайней мере, по двум направлениям. С одной стороны, она будет обогащаться новыми операционными средствами и методиками как составная часть компьютерного материаловедения. С другой – принципиальные изменения в рецептурах и технологиях строительных материалов (композиты повышенной надежности, нанотехнологии, экологически ориентированные технологии и т.д.) должны привести к уточнению и расширению ее методологии.



## Литература

1. Баженов Ю.М., Фаликман В.Р. Новый век: новые эффективные бетоны и технологии // Бетон на рубеже третьего тысячелетия: Мат. 1-ой Всерос. конф. по проблемам бетона и железобетона. – М., 2001. – Кн. 1. – С. 91-101.
2. ЭВМ и оптимизация композиционных материалов / В.А. Вознесенский, Т.В. Ляшенко, Я.П. Иванов, И.И. Николов. – К.: Будивельник, 1989. – 240 с.
3. Методических рекомендациях по применению экспериментально-статистических моделей для анализа и оптимизации состава, технологии и свойств композиционных материалов на основе щелочных вяжущих систем / Науч. ред. В.А. Вознесенский, П.В. Кривенко. – ОГАСА, НИИВМ. – К., 1996. – 105 с.
4. Voznesensky V.A., Lyashenko T.V. Experimental-statistical modelling in computational materials science. – Одесса: Астропринт, 1998. – 32 с.
5. Вознесенский В.А., Ляшенко Т.В. Методы компьютерного материаловедения и технология бетона // Будівельні конструкції: Міжвід. наук.-техн. зб. – К.: НДБК. – 2002. – Вип. 56: Сучасні проблеми бетону та його технологій. – С. 217-226.
6. Voznesensky V.A., Lyashenko T.V. Modelling, analysis and optimization of brittle matrix composites properties fields// Brittle Matrix Composites 4 : Proc. IV Int. Symp. – Cambridge, Warsaw : Woodhead Publ. Ltd. – 1994. – P. 255-263.
7. Ляшенко Т.В. Поля свойств строительных материалов (концепция, анализ, оптимизация). Автореф. дис. д-ра техн. наук: 05.23.05 / ОГАСА. – Одесса, 2003. – 34 с.
8. Ляшенко Т.В., Вознесенский В.А. Методы компьютерного материаловедения при анализе взаимосвязи реологических показателей композиций // Вісник Дон. ДАБА. Композиційні матеріали для будівництва: Зб. наук. пр. – Макіївка: Дон. ДАБА. – 2001. – Вип. 2001-1(26). – С. 67-74.
9. Вознесенский В.А., Ляшенко Т.В. Бутстреп – компьютерное «клонирование» данных натурального эксперимента // Моделирование и оптимизация в материаловедении: Мат-лы 42 межд. сем. – Одесса: Астропринт, 2003. – С. 3-5.